

Simulazione Monte Carlo sull'adroterapia e confronto con i
dati sperimentali

Luigi Masturzo

Indice

1	Perdita di energia delle particelle nella materia	2
2	Cattura elettronica e Carica efficace	3
3	Effetto di Shell	3
4	Potenziale di ionizzazione e Numero atomico efficace	4
5	Picco di Bragg	6
6	Straggling in energia	8
7	Range straggling	10
8	Scattering coulombiano in due dimensioni	14
9	Scattering coulombiano in tre dimensioni	17
10	K Factor	19
11	Picco di Bragg allargato	20
12	Conclusioni	22

Sommario

Il lavoro di seguito presentato verte sull'utilizzo di un codice Monte Carlo per simulare il comportamento di protoni all'interno della materia. I primi paragrafi saranno dedicati, seppur con un basso approfondimento teorico, alla spiegazione dei principali fenomeni di perdita di energia, raccolti nella nota formula di Bethe-Block. Dopo aver definito il range si cercherà di stimare la relazione che lo lega all'energia della particella entrante per poi confrontarla con i dati empirici (legge di Bragg-Kleeman). Nella parte finale si utilizzeranno i concetti già discussi per simulare un evento di interesse medico.

1 Perdita di energia delle particelle nella materia

Le particelle cariche pesanti perdono energia principalmente attraverso urti inelastici con gli elettroni degli atomi del materiale bersaglio. La perdita di energia per unità di lunghezza è chiamata *electronic stopping power*. Una prima trattazione classica di questa grandezza fu eseguita da Bohr nel 1913, portando alla seguente formula:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi z^2 e^4}{m_e v^2} N_e \ln \frac{m_e \gamma^2 v^3}{ze^2 \bar{\nu}} \quad (1)$$

Dove z e v rappresentano carica e velocità della particella incidente, γ il fattore di Lorentz, N_e la densità elettronica del materiale assorbitore e $\bar{\nu}$ la frequenza media di oscillazione degli elettroni intorno al nucleo atomico.

Una più precisa derivazione quanto-meccanica, che include aspetti relativistici, è la famosa equazione di Bethe-Bloch ricavata nel 1930.

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} = 4\pi N_a r^2 m_e c^2 Z p_{eff}^2 \frac{Z_{eff}}{A_{eff}} \frac{1}{\beta^2} \left(\ln \frac{2m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{I} - \beta^2 - \frac{\delta}{2} - \frac{C}{Z'} \right) \quad (2)$$

Salta subito all'occhio la dipendenza diretta dalla carica della particella (ma non dalla sua massa), dal numero atomico del materiale assorbitore e dal potenziale di ionizzazione I , parametro che sarà trattato più approfonditamente in seguito. Nei prossimi paragrafi si discuterà delle variabili $Z p_{eff}$ e Z_{eff} , rispettivamente la carica efficace della particella proiettile e la carica efficace del materiale. Come mostra la Figura(1) a basse energie predomina β^2 mentre ad alte energie una risalita logaritmica, opportunamente modulata dal fattore densità (non tenuto in considerazione nella simulazione). A basse energie vi sono ulteriori fattori da considerare che sono trattati in modo più approfondito in seguito. Inoltre non sono stati implementati fattori di frammentazione nucleari, responsabili della presenza di energia anche nella regione successiva al picco di Bragg.

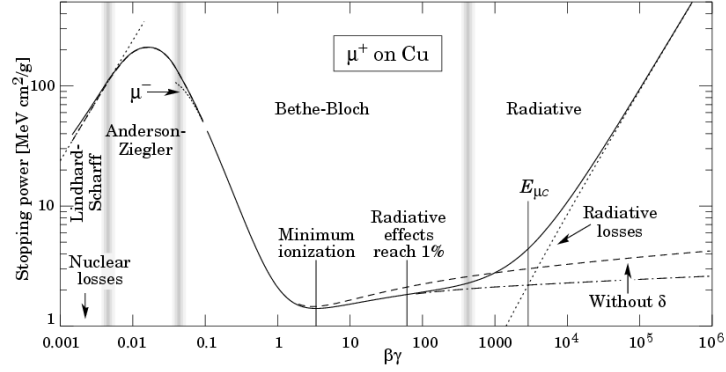


Figura 1: equazione di Bethe-Block per muoni che attraversano rame

2 Cattura elettronica e Carica efficace

Un effetto che si è tenuto in considerazione è quello legato alla cattura di elettroni da parte da parte della particella proiettile incidente. Ad alte energie gli elettroni del proiettile hanno una velocità orbitale inferiore alla velocità del nucleo del proiettile stesso e vengono strappati via nell'interazione facendo sì che la carica totale coincida con la carica nucleare, mentre a basse energie l'atomo incidente può catturare gli elettroni degli atomi della materia diminuendo la carica percepita. Per tener conto di questo effetto nella Bethe-Bloch si introduce una carica efficace, definita empiricamente da Barkas come segue:

$$Zp_{eff} = Z_p [1 - e^{-125\beta(Z_p^{-\frac{2}{3}})}] \quad (3)$$

Si nota che all'inizio del percorso, cioè ad alte energie $Z_{eff} \simeq Z_p$ mentre la differenza diventa apprezzabile ad energie più basse. Nel caso specifico del protone $Z_p = 1$

3 Effetto di Shell

A basse energie, invece, l'assunzione che l'elettrone atomico interagente con la particella proiettile sia a riposo non è più valida. Per tenerne conto si introduce nella Bethe-Block il termine:

$$C = (0.4223\eta^{-2} + 0.0304\eta^{-4} - 0.00038\eta^{-8})10^{-6}I^2 + (3.8501\eta^{-2} + 0.1668\eta^{-4} - 0.00158\eta^{-6})10^{-9}I^3 \quad (4)$$

Dove $\eta = \beta\gamma$ ed i coefficienti numerici derivano da calcoli quantistici sull'interazione della particella proiettile con gli elettroni di ogni orbitale atomico.

4 Potenziale di ionizzazione e Numero atomico efficace

Ogni elemento nella tavola periodica è caratterizzato da un potenziale di ionizzazione I ossia dell'energia necessaria che deve essere fornita per strappargli un elettrone. In Figura 2 è mostrato l'andamento di I in funzione del numero atomico dell'elemento considerato: si noti che il potenziale cresce all'interno dello stesso periodo e diminuisce all'interno dello stesso gruppo, con un massimo in corrispondenza dei gas nobili: il motivo è facilmente riconducibile alla loro configurazione elettronica che è la più stabile possibile e di conseguenza la più difficile da variare. La fascia grigia in figura indica il primo modello di andamento proposto da Bloch $I = z * 10$ che può essere accettato entro un ragionevole errore per gli elementi con $z > 20$ ma è completamente inadatto a descrivere quelli più leggeri. Ad oggi il modello accettato è il seguente :

$$\frac{I}{z} = 12 + \frac{7}{z} \quad z < 13 \quad (5)$$

$$\frac{I}{z} = 9.76 + 58.8z^{-1.19} \quad z > 13 \quad (6)$$

Dove z indica il numero atomico del materiale assorbitore.

In presenza di composti si effettua una media pesata sui potenziali di ionizzazione dei singoli elementi:

$$\ln I = \frac{\sum w_j \frac{Z_j}{A_j} \ln(I_j)}{\sum w_j \frac{Z_j}{A_j}} \quad (7)$$

dove w_j è la frazione in peso del materiale all'interno del composto.

Per l'acqua il valore standard è $I = 75eV$, ma viene continuamente corretto in base ai dati sperimentali. La sua esatta determinazione è difficile, sia dal punto di vista teorico che sperimentale. In figura 2 sono riportati i principali valori utilizzati nel corso del tempo nell'ambito di diversi esperimenti. Nel paragrafo successivo si analizzeranno le variazioni sulla principale grandezza di interesse (profondità massima di penetrazione) derivanti da alterazioni del valore del potenziale efficace.

Risulta conveniente definire il numero atomico efficace che corrisponde alla carica effettivamente percepita dalla particella proiettile.

$$Z_{eff} = \left(\sum_i (w_i)^3 Z_i \right)^{\frac{1}{3}} \quad (8)$$

Dove w_i rappresenta l'abbondanza relativa dell'elemento i -esimo nel composto considerato. Allo stesso modo si definisce il numero di massa efficace A_{eff}

$$A_{eff} = \left(\sum_i (w_i)^3 A_i \right)^{\frac{1}{3}} \quad (9)$$

Nel caso particolare dell'acqua, $Z_{eff} = 7.4$ e $A_{eff} = 15.37$

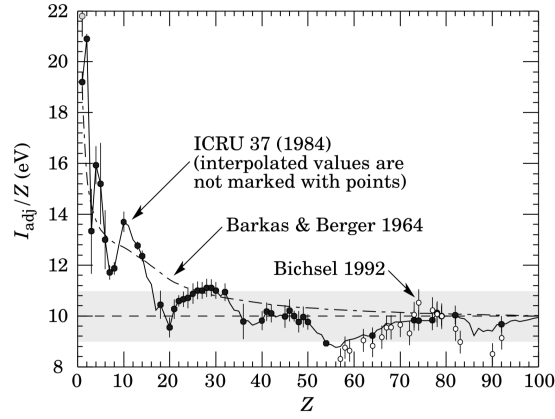


Figura 2: Potenziale di ionizzazione in funzione del numero atomico del materiale

I (eV)	Reference	Method or remark
75.4 ± 1.9^{19}	Thompson, 1952	Range, 340 – 200 MeV p, assuming $I_{Cu} = 322$ eV
74.6 ± 2.7	Nordin et al., 1979	Stopping power, 60 MeV pions
75	Ritchie et al., 1978	Dielectric response function
75.4	Ashley, 1982	Dielectric response function
81.77	Janni, 1982	Averaging data for H and O
79.7 ± 2	Bichsel et al., 1992	Ionization curves, 70 MeV p
81.8	Dingfelder et al., 1998	Dielectric response function
80.0	Bichsel et al., 2000	C ions, 290 MeV/u
77	Kramer et al., 2000	Depth dose curves for C ions
78.4	Kumazaki et al., 2007	Depth dose curves for protons
78	Schardt et al., 2008	Bragg curves for H, He, Li, C, and O ions
75.0 ± 3	Chosen in ICRU 37, 49	
78.0 ± 2	Chosen in Sigmund et al. (2009)	Replaces the value 67.2 eV in ICRU Report 73

Figura 3: valori del potenziale di ionizzazione dell'acqua

5 Picco di Bragg

Per loro natura le particelle cariche pesanti rilasciano la maggior parte dell'energia alla fine del loro percorso, in un punto preciso detto picco di Bragg, mentre la regione antecedente è caratterizzata da un rilascio di energia praticamente costante (condizione di plateau). I grafici seguenti mostrano un'arresto totale della particella in corrispondenza del range massimo (la funzione di Bethe-Block diverge per $\beta \rightarrow 0$) corrispondente a valori altissimi (e non veri) di perdita di energia. Si osserva invece un picco dopo il quale la curva continua in conseguenza a fenomeni di frammentazione nucleare. Per questo motivo si è scelto di applicare un taglio all'energia persa in prossimità del picco di Bragg (che non inficia i risultati della simulazione).

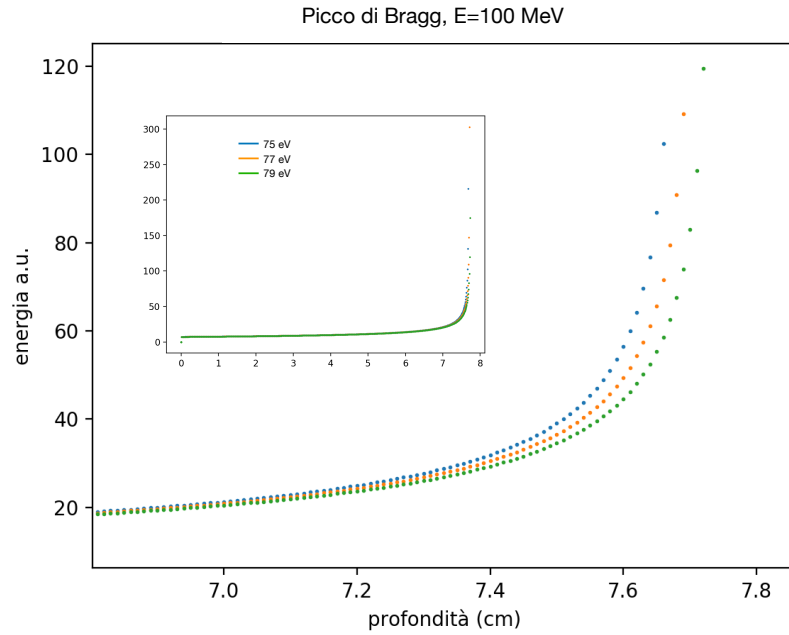


Figura 4: Curva di Bragg per protoni con energia nominale di 100 MeV in acqua liquida. La differenza di colorazione nelle tre curve corrisponde a valori differenti di potenziale di ionizzazione.

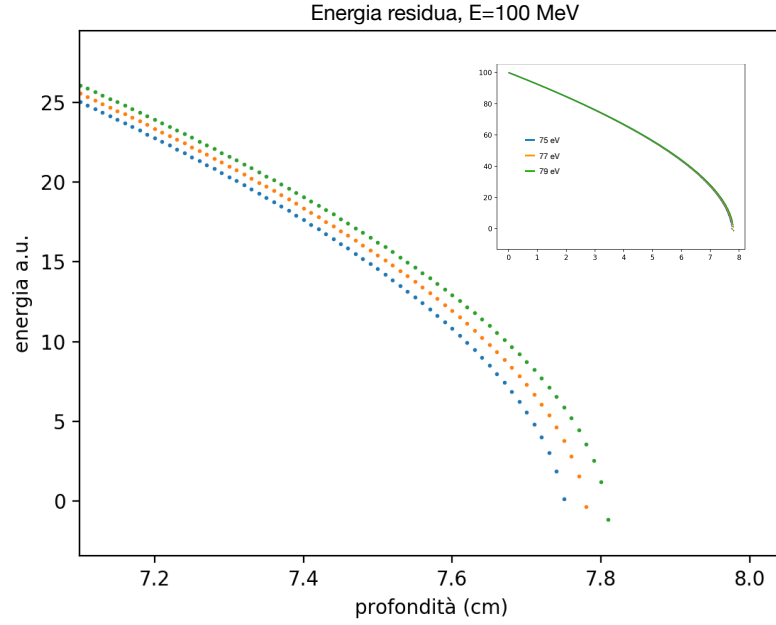


Figura 5: Energia residua per protoni con energia nominale di 100 MeV in acqua. La differenza di colorazione nelle tre curve corrisponde a valori differenti di potenziale di ionizzazione.

Dalla Figura 4 e Figura 5 si nota che ad un potenziale di ionizzazione maggiore corrisponde un range maggiore compiuto dalla particella (cioè una perdita di energia media minore): questo comportamento è spiegabile sia osservando la dipendenza del potenziale di ionizzazione nella formula di Bethe-Bloch ($\sim \ln(1/I)$), sia notando che se il potenziale di ionizzazione è maggiore è più difficile ionizzare il materiale e di conseguenza la particella ha una probabilità minore di ionizzare e di perdere energia.

Lo stesso procedimento è stato applicato nel caso in cui il materiale attraversato sia tessuto osseo compatto, quindi con un potenziale di ionizzazione sensibilmente maggiore ($I \simeq 92\text{eV}$).

In entrambi i casi si osserva che le variazioni del potenziale di ionizzazione producono variazioni del range sono minime, poichè dipendono logaritmicamente da I .

Nel seguito della simulazione è stato scelto di fissare il potenziale di ionizzazione dell'acqua a $I = 77\text{eV}$, mentre quello del tessuto osseo a $I = 91\text{eV}$.

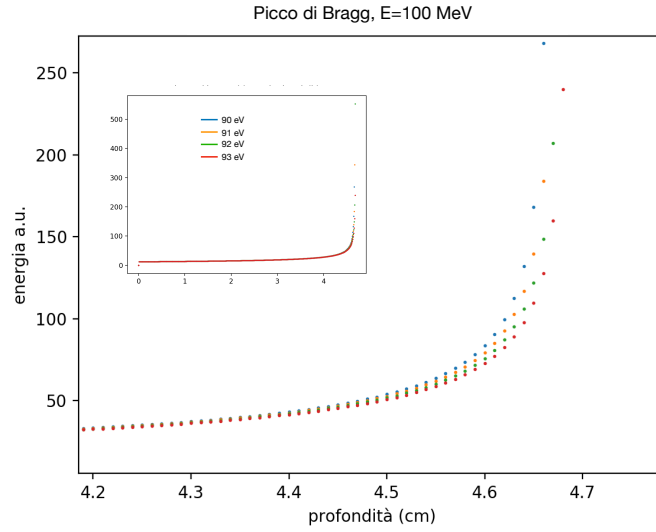


Figura 6: Curva di Bragg per protoni con energia nominale di 100 MeV in tessuto osseo. La differenza di colorazione nelle quattro curve corrisponde a valori differenti di potenziale di ionizzazione.

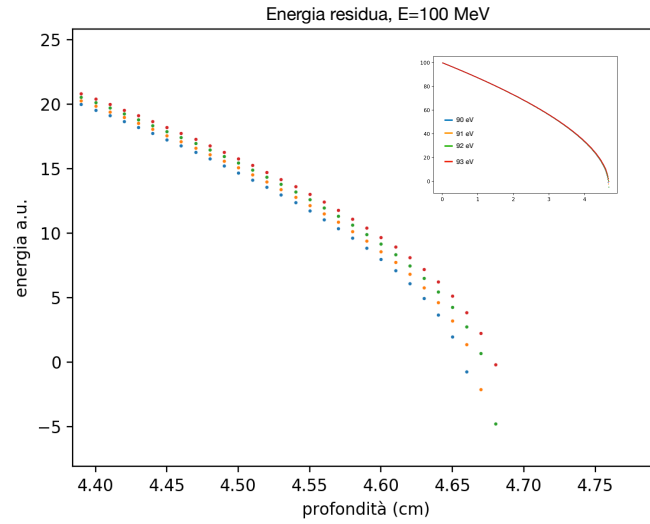


Figura 7: Energia residua per protoni con energia nominale di 100 MeV in tessuto osseo. La differenza di colorazione nelle quattro curve corrisponde a valori differenti di potenziale di ionizzazione.

6 Straggling in energia

Il valore di energia calcolato con la formula di Bethe-Bloch è un valor medio, che ha una distribuzione in energia dipendente dallo spessore del segmento di materiale attraversato. Nel

dettaglio, si introduce l'analisi del parametro ζ definito come segue

$$\zeta = \frac{\Delta E_{BB}}{T} \quad (10)$$

$$T = \frac{2m_e c^2 \gamma^2 \beta^2}{1 + 2\gamma \frac{m_e}{m_p} + \frac{m_e^2}{m_p^2}} \quad (11)$$

dove il numeratore rappresenta l'energia persa dalla particella calcolata con la formula di Bethe-Block e il denominatore T indica la massima energia trasferibile ad un elettrone atomico.

Se $\zeta < 0.01$ (*assorbitore sottile*) la perdita di energia segue la distribuzione di Landau, caratterizzata da un picco asimmetrico in prossimità di valori piccoli di energia e lunghe code: questo rispecchia il fatto che sono più probabili urti con piccolo scambio di energia e meno probabili urti con alto scambio di energia e conseguente produzione di raggi delta (non trattati in questa simulazione).

Se $\zeta > 10$ (*assorbitore spesso*) la perdita di energia segue la distribuzione normale, piccata nel valore calcolato con la Bethe-Bloch e la seguente varianza σ :

$$f(\Delta E) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\Delta E - \Delta E_{BB})^2}{2\sigma^2}} \quad (12)$$

$$\sigma = D m_e c^2 z^2 \rho \frac{Z}{A} x \quad (13)$$

Dove $D = 0.307 \text{ Mev cm}^2/\text{mole}$ e x indica il passo scelto nella simulazione.

L'utilizzo di una gaussiana è facilmente giustificabile dal fatto che in un assorbitore spesso si ha la presenza di un gran numero di urti che presi singolarmente hanno poco peso statistico, ma in collettivo garantiscono la validità del teorema del limite centrale.

Per spessori intermedi la perdita di energia segue la distribuzione di Vavilov, che si riconduce alle altre sopra citate nel limite di grandi e piccoli spessori. Non è stata considerata in questa simulazione poichè di difficile campionamento e soprattutto poichè si è lavorato nelle altre due regioni.

L'approssimazione di assorbitore spesso può essere fuorviante portando ad una imprecisa stima dell'energia persa dalla particella, poichè per definizione lo spessore x v'è scelto "grande" così da rispettare le condizioni imposte dal parametro ζ ; ma, allo stesso tempo, bisogna mantenere x "piccolo" per poter approssimare $\frac{dE}{dx} \approx \frac{\Delta E}{\Delta x}$ (così da poter calcolare l'energia persa step by step). Tutto questo porta a dei valori del parametro ζ buoni nelle regioni finali della curva di Bragg, ma completamente errati nelle regioni iniziali.

Considerando che il campionamento della distribuzione di Landau è anch'esso tedioso, nella simulazione si è fatto uso di un'approssimazione di tale distribuzione definita come segue:

$$L(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{1}{2}(\lambda + e^{-\lambda})} \quad (14)$$

$$\lambda = \frac{E - E_p}{\xi} \quad (15)$$

$$\xi = 2\pi N_a m_e c^2 z^2 \frac{Z}{A} \frac{1}{\beta^2} \rho x \quad (16)$$

$$E_p = \xi \left(\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} \right) + \ln \frac{\xi}{I} + 0.2 - \beta^2 \right) \quad (17)$$

Dove E_p rappresenta l'energia persa nel picco della distribuzione.

Tutto questo ha permesso di esplorare la perdita di energia a passi del decimo di millimetro ($x = 1\mu m$).

7 Range straggling

Con la parola range si indica il tragitto che le particelle cariche compiono nel mezzo prima di perdere la loro energia ed è chiaramente un parametro fondamentale per la caratterizzazione del deposito di energia longitudinale. Un accurato calcolo del range richiederebbe di dover tener conto di un alto numero di fattori, per questo motivo si è fatto uso di numerose approssimazioni tra cui la più importante è l'approssimazione CSDA (*Continuous Slowing Down Approximation*) basata sulla supposizione che la particella perda energia in modo continuo. Altre approssimazioni sono l'assenza di interazioni nucleari, della produzione di raggi delta e, almeno in una prima parte, dello scattering coulombiano multiplo (MCS). I dati di confronto utilizzati sono presi dal NIST, questi sono calcolati in maniera diversa eseguendo l'integrale completo della Bethe-Block (della parte elettronica e nucleare) trascurando le fluttuazioni in energia, e lo scattering coulombiano multiplo è implementato risolvendo l'equazione di trasporto col metodo di Lewis (basato sull'utilizzo nella simulazione di sezioni d'urto).

$$R = \int_0^L dx = \int_E^0 dE \frac{1}{\frac{dE}{dx}} \quad (18)$$

Nella seguente tabella sono riportati i valori di range simulati (in regime di assorbitore spesso) per fasci di protoni monoenergetici affiancati dai valori riportati dal NIST;

L'errore è stato stimato calcolando la deviazione standard su un campione di 100 protoni per ogni valore di energia.

E_0 (Mev)	R (cm)	σ_R (cm)	R NIST (cm)
50	2.259	0.001	2.233
100	7.779	0.001	7.741
150	15.884	0.001	15.817
200	26.130	0.001	26.038
300	51.753	0.001	51.544

Tabella 1: valori di range trovati in regime di assorbitore spesso con protoni monoenergetici

Successivamente si è simulato il range (in regime di assorbitore sottile) per un fascio di protoni con un'energia distribuita secondo una gaussiana con valor medio E_0 varianza σ pari a $0.01MeV$.

$$f(E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (19)$$

E_0 (Mev)	R(cm)	σ_R (cm)	R NIST(cm)
50	2.38	0.01	2.233
100	8.08	0.01	7.741
150	17.50	0.01	15.817
200	30.11	0.01	26.038
300	60.28	0.01	51.544

Tabella 2: valori di range trovati in regime di assorbitore sottile con protoni con una distribuzione normale in energia

E successivamente lo stesso procedimento per assorbitori spessi:

Energy (Mev)	R(cm)	σ_R (cm)	R NIST(cm)
50	2.25	0.09	2.233
100	7.79	0.09	7.741
150	15.88	0.02	15.817
200	26.13	0.06	26.038
300	51.75	0.02	51.544

Tabella 3: valori di range trovati in regime di assorbitore spesso con protoni con una distribuzione normale in energia

I valori simulati non risultano compatibili entro le incertezze con i valori tabulati del NIST: questo può essere dovuto al fatto che la modalità con la quale sono ottenuti i valori non è precisa e rigorosa quanto quella del NIST, ma fa uso di svariate approssimazioni. Inoltre, per i valori di energia calcolati per assorbitori sottili, si nota che il range calcolato sovrastima sempre quello tabulato, con un divario che accresce all'aumentare dell'energia. Una spiegazione può risiedere nel fatto che alle approssimazioni già menzionate di sopra si è aggiunto l'aver trascurato la produzione di raggi delta. Per l'inaccuratezza dei dati il resto della simulazione è stata eseguita in regime di assorbitore spesso.

Si è successivamente stimata la relazione che intercorre tra energia del fascio e range percorso eseguendo un fit con una funzione di potenza del tipo:

$$R = \alpha(E_0)^p \quad (20)$$

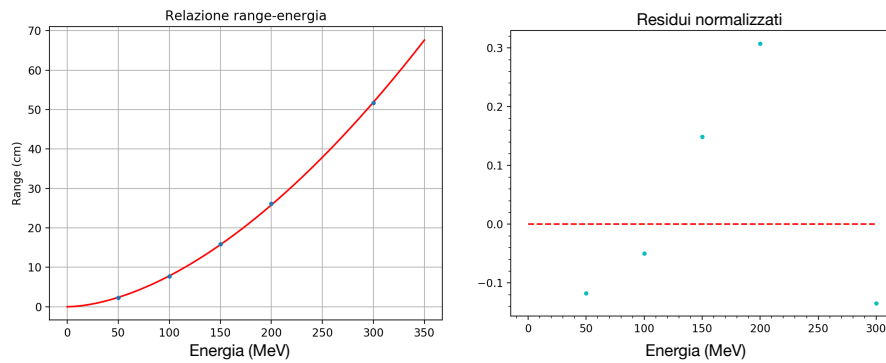


Figura 8: relazione tra energia e range

	α (cm/MeV)	p	χ^2
valori stimati	0.0030 ± 0.0009	1.70 ± 0.03	192.47
valori sperimentali	0.00246 ± 0.00005	1.74 ± 0.02	

Tabella 4: valori stimati dal fit

Il test del χ^2 ha dato esito negativo, per questo motivo l'ipotesi di una dipendenza dalla legge di potenza (nel range di energia da me esplorato) non è consistente. I valori di range con i quali è stato eseguito il fit sono stati calcolati eseguendo per ognuno una media su 50 range, di cui ognuno di essi stimato per 100 protoni, così da avere un errore gaussiano (in accordo con il teorema del limite centrale) I valori sono in accordo con modello semi-empirico sviluppato da Bragg-Kleeman pur essendo un modello sperimentale che considera di per sè tutti gli effetti di correzione trascurati nella simulazione.

Per stimare l'errore commesso nel trascurare multiple scattering, interazioni nucleari e correzioni ad alte e basse energie, si è calcolata l'energia persa utilizzando la legge di Bragg-Kleeman ed inserendo i valori sperimentali:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\alpha^{(-\frac{1}{p})}}{p} (R - x)^{\frac{1}{p}-1} \quad (21)$$

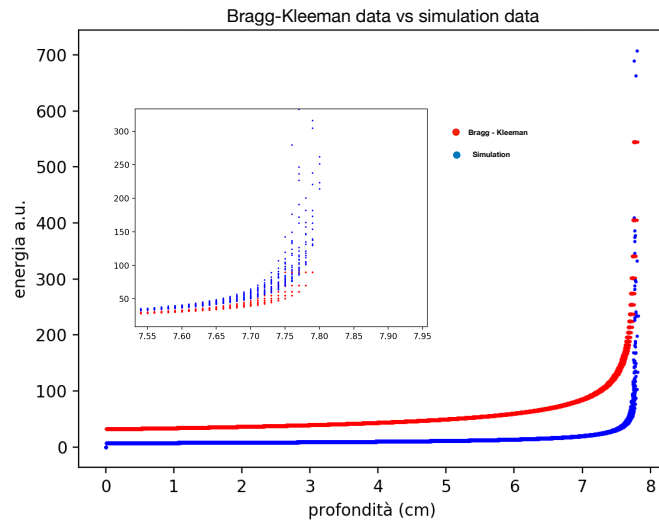


Figura 9: Bragg-Kleeman e simulazioni

Si nota che l'andamento generale presenta valori di perdita di energia maggiori dovuti agli effetti non considerati, primo tra tutti la frammentazione nucleare.

8 Scattering coloumbiano in due dimensioni

Si è simulato il percorso della particella considerando lo scattering coloumbiano multiplo (MCS). La particella, passando all'interno del materiale rilascia energia ed allo stesso tempo subisce delle deviazioni dalla traiettoria originale dovute alla diffusione elastica nel campo coulombiano dei nuclei.

La distribuzione che descrive correttamente il fenomeno è quella di Rutherford:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{zZr_em_ec^2}{pv} \right)^2 \frac{1}{4(\sin(\frac{\theta}{2}))^4} \quad (22)$$

Data la dipendenza dal $(\sin(\frac{\theta}{2}))^4$ gli angoli privilegiati sono quelli piccoli. Si è scelto di procedere con un' approssimazione gaussiana per piccoli angoli , ottenuta arrestandosi al primo ordine della formula sviluppata da Molière.

Nel 1948 Molière ha calcolato la distribuzione dell'angolo di diffusione θ come soluzione analitica dell' equazione del trasporto trovandosi in ottimo accordo con i dati sperimentali. Tale soluzione ha un' espressione complicata:

$$f(\theta)d\theta = \frac{f_M(\theta)}{2\pi} d(\cos \theta)d\phi \quad (23)$$

che, con l' approssimazione $d \cos \theta = \sin \theta d\theta = \theta d\theta$, può essere scritta come somma di vari termini:

$$f_M(\theta) = \frac{1}{2\theta_0^2} (f^0(\theta') + \frac{f^1(\theta')}{B} + \dots) \quad (24)$$

$$\theta_0 = \frac{13.6}{\beta p} z \sqrt{\frac{x}{x_0}} (1 + 0.038 \ln \frac{x}{x_0}) \quad (25)$$

Dove $\theta' = \frac{\theta}{\sqrt{2}\theta_0}$.

Il primo termine è per l'appunto una gaussiana della forma:

$$P(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\theta_0} e^{-\frac{\theta^2}{2\theta_0^2}} \quad (26)$$

Le equazioni per le coordinate step by step della particella sono date da:

$$x = x + dx \cdot \cos \theta \quad (27)$$

$$y = y + dx \cdot \sin \theta \quad (28)$$

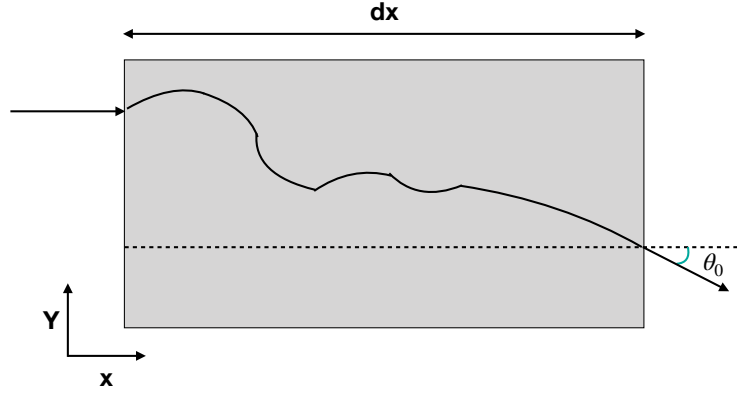


Figura 10: Deflessione gaussiana dovuta a tanti urti nel materiale

E' stato stimato il range sul piano longitudinale per varie energie di protoni, considerando una dimensione iniziale del fascio distribuita uniformemente su un cerchio di raggio $0.1mm$ giacente sul piano yz .

Il passo scelto è stato di $x = 1mm$ poichè non è stato possibile eseguire la simulazione nell'approssimazione di spessori sottili: la formula utilizzata per l'angolo θ sostanzialmente stima la deflessione totale nel caso in cui la particella abbia subito numerosi urti all'interno dello step considerato, cosa possibile solo in assorbitori spessi.

Nella seguente tabella sono riportati i risultati ottenuti.

Energy (MeV)	R (cm)	$\sigma_R(\text{cm})$	R NIST (cm)
50	2.24	0.01	2.234
100	7.76	0.03	7.730
150	15.86	0.02	15.807
200	26.10	0.05	26.008
300	51.74	0.02	51.604

Tabella 5: valori di range ottenuti nel piano in regime di assorbitore spesso con protoni con una distribuzione normale in energia

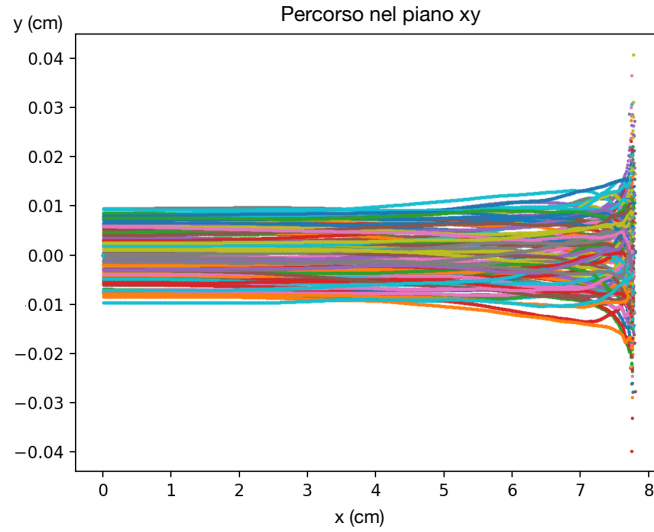


Figura 11: profilo di un fascio di 70 protoni sul piano x-y

E' stato eseguito il fit con lo stesso modello proposto precedentemente per ritrovare l'andamento tra range ed energia proposto da Bragg-Kleeman.

Il test del χ^2 ha dato esito negativo, per questo motivo l'ipotesi di una dipendenza dalla legge di potenza considerando lo scattering coulombiano multiplo nel piano (nel range di energia da me esplorato) non è consistente.

Di seguito sono riportati i valori ottenuti dal fit

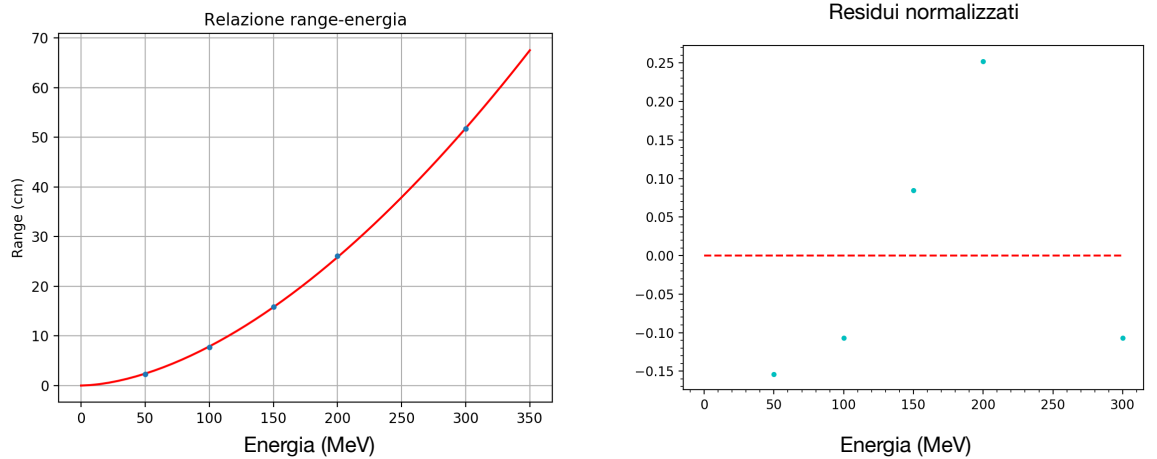


Figura 12: Relazione tra range ed energia (sinistra), residui normalizzati (destra).

	α (cm/MeV)	p	χ^2
valori stimati	0.0030 ± 0.0007	1.70 ± 0.01	156
valori sperimentali	0.00246 ± 0.00005	1.74 ± 0.02	

Tabella 6: valori stimati dal fit

9 Scattering coulombiano in tre dimensioni

Seguendo lo stesso ragionamento adottato per descrivere il moto bidimensionale della particella proiettile si è implementato nella simulazione lo scattering in nello spazio tridimensionale.

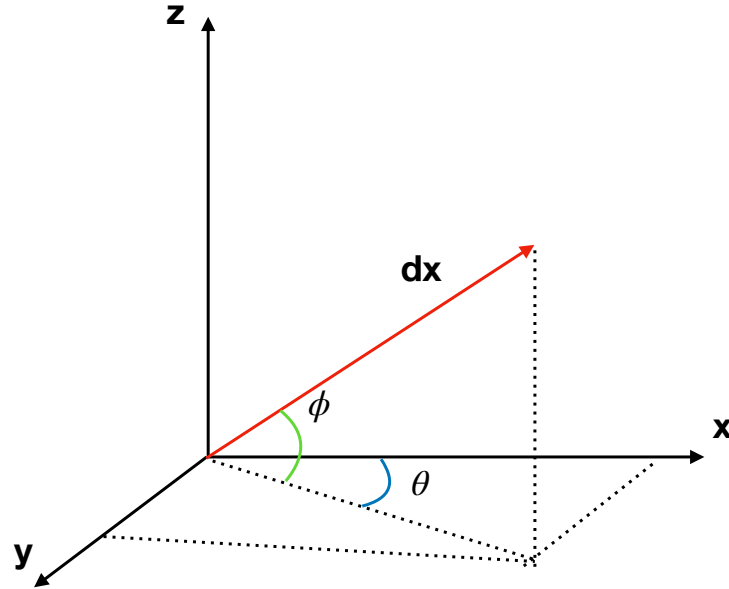


Figura 13: coordinate nello spazio

Il seguente calcolo è affidabile per angoli piccoli (quindi per tutto il percorso della particella ma non nella parte finale) poichè si è usata l'approssimazione $\theta_{tot}^2 = \theta^2 + \phi^2$. Le formule utilizzate sono le seguenti:

$$x = x + dx \cdot \cos \theta \cdot \cos \phi \quad (29)$$

$$y = y + dx \cdot \sin \theta \cdot \cos \phi \quad (30)$$

$$z = z + dx \cdot \sin \phi \quad (31)$$

I risultati ottenuti sono riportati in tabella:

Energy (Mev)	R (cm)	$\sigma_R(\text{cm})$	R NIST (cm)
50	2.21	0.01	2.234
100	7.8	0.2	7.730
150	15.78	0.05	15.807
200	26.00	0.08	26.008
300	51.60	0.09	51.604

Tabella 7: valori di range ottenuti nello spazio in regime di assorbitore spesso con protoni con una distribuzione normale in energia

Nonostante le approssimazioni i risultati ottenuti risultano essere compatibili con i dati tabulati dal NIST. Il grafico seguente raggruppa i valori di range trovati con le relative incertezze. Essendo molto vicini l'uno all'altro, a titolo d'esempio si è ingrandito un gruppo di valori per una data energia.

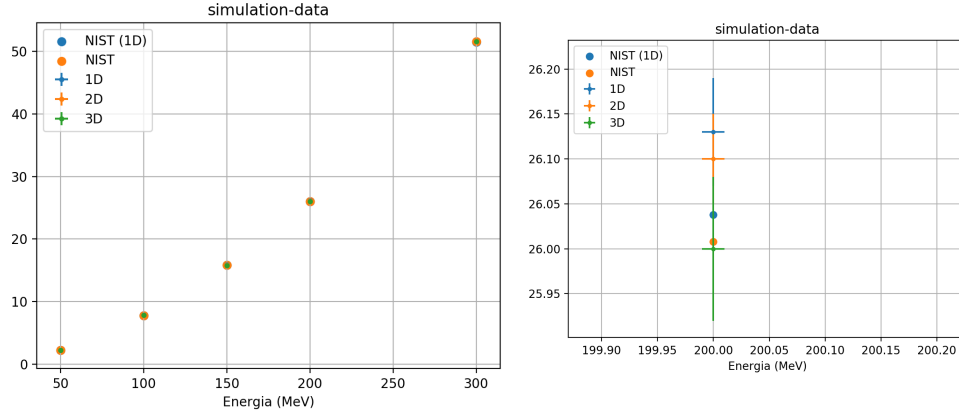


Figura 14: Valori di range stimati in più dimensioni a confronto con i dati del NIST.

Anche in questo caso è stato eseguito il fit per stimare la legge che intercorre tra energia e range percorso e di seguito ne sono riportati i valori ottenuti.

Il test del χ^2 ha dato esito negativo, per questo motivo l'ipotesi di una dipendenza dalla legge di potenza considerando lo scattering coulombiano multiplo nello spazio (nel range di energia da me esplorato) non è consistente.

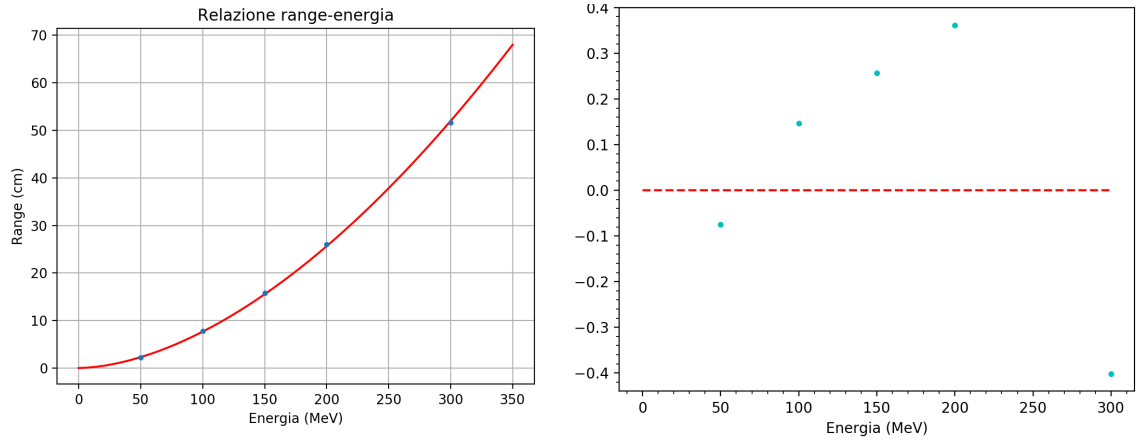


Figura 15: Relazione tra range ed energia (sinistra), residui normalizzati (destra).

	α (cm/MeV)	p	χ^2
valori stimati	0.0030 ± 0.0005	1.70 ± 0.01	48.77
valori sperimentali	0.00246 ± 0.00005	1.74 ± 0.02	

Tabella 8: valori stimati dal fit

10 K Factor

Alla fine della simulazione si è deciso di definire un fattore di correzione K che tiene conto dell'errore commesso nei calcoli rispetto ai dati del NIST. In particolare può essere applicato a future simulazioni per aggiungere una ulteriore correzione.

$$K = \frac{R_{NIST}}{R_{simulazione}} \quad (32)$$

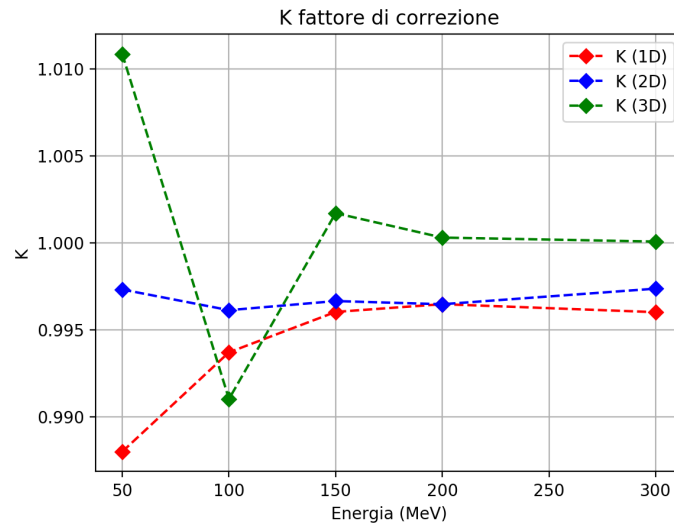


Figura 16: K factor

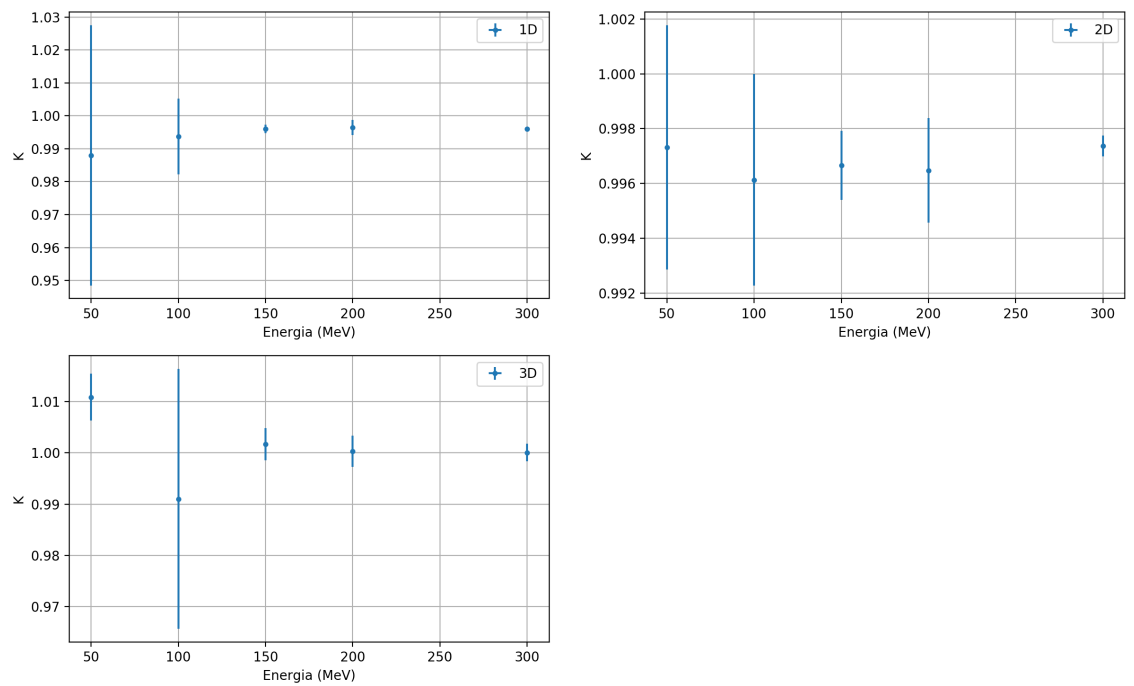


Figura 17: K factor con le relative incertezze

11 Picco di Bragg allargato

Per irraggiare correttamente una massa tumorale con un'estensione non trascurabile, in adroterapia si usa mandare fasci di protoni a diverse energie per coprire tutta l'area di interesse. La

sovrapposizione di tutti i picchi di Bragg dà origine ad una distribuzione costante chiamata picco di Bragg allargato (*Spread Out Bragg Peak*).

Di seguito si è simulato lo SOBP per la cura di una massa tumorale nel cervello. La simulazione, che avviene nel caso unidimensionale, prevede che i protoni attraversino prima $2mm$ di pelle e successivamente $1.8cm$ di osso (scatola cranica), dimensioni che approssimano bene i reali spessori.

E' stato necessario calcolare le quantità presenti nella formula di Bethe-Block per i tessuti in questione:

	I (eV)	ρ (g/cm ³)	Z_{eff}	A_{eff}
acqua	75	0.998	7.4	15.37
pelle	72	1.1	7.92	14.40
osso	91	1.85	11.77	22.38
cervello	75	1.03	7.38	14.77

Il tumore simulato ha una dimensione di $1cm$. Sono stati mandati 3227 protoni con un energia che segue una distribuzione gaussiana, con varianza $\sigma = 0.01MeV$ e valor medio tra i $90 MeV$ e i $100 MeV$.

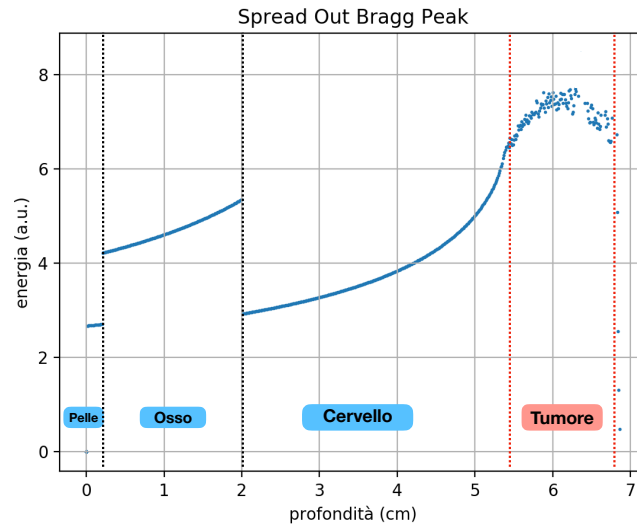


Figura 18: Picco di Bragg allargato

Dal grafico si evince che il percorso da $5.5cm$ a $6.5cm$ è irraggiato dal fascio entrante con una distribuzione quasi costante. Per la modalità con la quale è stata calcolata l'energia persa (discussa nei paragrafi precedenti) non si è potuto lavorare con una distribuzione continua, ma solamente con

valori discreti per ogni singolo protone: questo spiega come mai in corrispondenza del picco sono presenti delle "fluttuazioni". Inoltre è assente dalle curve di Bragg simulate la parte antecedente al picco che avrebbe permesso alla distribuzione di essere costante.

Si nota anche il comportamento della perdita di energia nelle diverse regioni utilizzate: è sostanzialmente più alta nella regione ossea mentre ha circa lo stesso andamento nella pelle e nel cervello (che ricalca quello dell'acqua). Questo perchè a parità di densità si perde meno energia in materiali con alto potenziale di ionizzazione. Il tessuto osseo ha una densità maggiore di quella dell'acqua che si traduce in valori sistematicamente maggiori di energia persa per unità di percorso.

12 Conclusioni

In questa simulazione Monte Carlo si è studiato il comportamento della perdita di energia per protoni all'interno della materia che è dovuta essenzialmente a fattori di interazioni elettronica e nucleare. Si sono analizzati a fondo i primi mediante la formula di Bethe-Block e le relative correzioni, mentre si sono trascurati i secondi. I risultati sono compatibili con i dati sperimentali nonostante le numerose approssimazioni. La bontà dei risultati si è espressa analiticamente con il fattore di correzione K che si discosta di qualche percentuale dall'unità in ogni caso analizzato. Infine si sono utilizzati i risultati ottenuti per simulare il percorso dei protoni all'interno di materiali diversi.